TITLE:

重力場での拡散方程式の解とその特性 : 1. インパルス応答

AUTHOR(S):

餌取, 寛次

CITATION:
餌取, 寛次. 重力場での拡散方程式の解とその特性 : 1. インパルス応答. 物性研究 1981, 36(4): 209-215

ISSUE DATE:
1981-07-20

URL:
http://hdl.handle.net/2433/90349

RIGHT:

京都大学学術情報リポジトリ
KURENAI 紅
Kyoto University Research Information Repository

物性研究 36－4(1981－7)

重力場での拡散方程式の解とその特性
1. インパルス応答*)

宮崎大・工・応物　　餌 取 寛 次

（1981年6月3日受理）

アブストラクト

重力に基づく非定常速度を有する粒子について，その粒子数密度の拡散方程式が Fourier 変換を用いて解かれ，その結果インパルス応答としての解が見出される。更にこの解が重力場を無視した従来の Gauss 分布解と比較され，その“ずれ”の項に簡単な統計的評価が与えられる。

§1. 序

ランダムに運動している多くの粒子の非定常なふるまいは，確率論的定式化の Taylor 展開に対する近似的取扱いから，Brown 運動に対する数学的モデルとして一般的に拡散方程式によって示されている。すなわち，大気中での気体分子や結晶固体中での原子の拡散は，その研究の多くが従来から重力の影響を考慮しない形で扱われ，その典型的な分布は瞬間的な点源に対するものとして，Gauss 型として示されている。[1~4] 重力場において，粒子がその重力方向にある非定常な速度を有しながら同時に拡散していくといった実際的問題については，その詳細な検討が殆どなされていない。

この重力場での粒子拡散を取扱った初期の例は，Langevin 方程式による粒子の Brown 運動を扱った Chandrasekher によるもので，それはSmoluchowskiの式に基づく解析であって，重力方向への粒子速度は一定とした簡単化によってなされている。[5] その他にも幾つかの解析的検討による報告があるが，それらのいずれにも粒子に及ぼす重力の影響はあらわには扱われていない。[6~8]

今回の報告では，z 方向での重力に基づく粒子の非定常速度項を含む一次元拡散方程式について，そのインパルス応答としての解が Fourier 変換[9] によって容易に得られることを示し，この解の Gauss 分布解からの“ずれ”に対する各定数（重力加速度 g，まさつ抵抗 γ 及び拡散定数 D）の関係及びこの“ずれ”に対する統計的見地[10]からの簡単な評価を解析的に検討したものである。[11]

ETORI, Kanji

*) 本稿は「衝撃工学，宇宙・特殊環境工学シンポジウム」（東大宇宙研，1979年9月）において発表した内容を更に書き改めたものである。

§ 2　重力場での拡散方程式

質量 m の粒子に対する任意時刻 t でのLangevin 方程式，任意の位置 z においてFickの法則に基づく粒子流 $\boldsymbol{J}(z,t)$ 及び粒子数密度 $\rho(z,t)$ に対する連続の方程式は，それぞれ次のように与えられる[7]。

$$m\frac{dv(t)}{dt}=-\gamma\cdot v(t)-mg+R(t)\quad, \tag{2.1}$$

$$\boldsymbol{J}(z,t)=\rho(z,t)\,v(t)-D\frac{\partial\rho(z,t)}{\partial z}\quad, \tag{2.2}$$

$$\frac{\partial\rho(z,t)}{\partial t}+\operatorname{div}\boldsymbol{J}(z,t)=0\quad, \tag{2.3}$$

ただし $v(t)$ 及び $R(t)$ は，重力方向における粒子の速度及び周囲媒体が粒子に及ぼすランダムな力を示す。

上記(2.1)～(2.3)式で γ 及び D は一定と仮定されているので，$\rho(z,t)$ に対する拡散方程式は重力場の影響を $v(t)$ に含めて次のように示される。

$$\frac{\partial\rho(z,t)}{\partial t}=-v(t)\frac{\partial\rho(z,t)}{\partial z}+D\frac{\partial^2\rho(z,t)}{\partial z^2}$$
$$-\infty<z<\infty,\quad t>0\quad, \tag{2.4}$$

ただし $v(t)$ は z 軸と θ の角をなす粒子初速度 v_0 として(2.1)式から

$$v(t)=v_0\cos\theta\cdot\exp\left(-\frac{\gamma}{m}t\right)-\left(\frac{mg}{\gamma}\right)\left[1-\exp\left(-\frac{\gamma}{m}t\right)\right]$$
$$+\frac{1}{m}\int_0^t R(t')\cdot\exp\left[-\frac{\gamma}{m}(t-t')\right]dt \tag{2.5}$$

によって与えられるものである。

§ 3　解

初期及び境界条件としてデルタ関数 $\delta(z)$ を用いると

$$\rho(z,0)=\rho_0\cdot\delta(z)\qquad \rho_0：\text{初期粒子数密度}\quad, \tag{3.1}$$

$$\rho(\pm\infty,t)=0\qquad \left.\frac{\partial\rho(z,t)}{\partial z}\right|_{z\to\pm\infty}=0 \tag{3.2}$$

Fourier 変換によって (2.4) 式は

$$\frac{d\hat{\rho}(k,t)}{dt} = -\left[k^2 D + ikv(t)\right]\cdot\hat{\rho}(k,t) \tag{3.3}$$

ただし $\hat{\rho}(k,t)$ は $\rho(z,t)$ の Fourier 変換であって次の式で定義される。

$$\hat{\rho}(k,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(z,t)\cdot\exp(-ikz)\,dz, \qquad k：実変数$$

(3.1) 式の Fourier 変換と (3.3) 式の積分から

$$\hat{\rho}(k,t) = \rho_0\cdot\exp\left[-k^2 Dt - ik\int_0^t v(t)\,dt\right]。 \tag{3.4}$$

したがって (3.4) 式に対する逆変換から

$$\begin{aligned}
\rho(z,t) &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\rho(k,t)\cdot\exp(ikz)\,dk \\
&= \frac{\rho_0}{2\pi}\cdot\exp\left[-\frac{1}{4Dt}\left(z-\int_0^t v(t')\,dt'\right)^2\right] \\
&\quad\times\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left\{-\left[k\sqrt{Dt}-\frac{i}{2\sqrt{Dt}}\left(z-\int_0^t v(t')\,dt'\right)\right]^2\right\}dk \\
&= \frac{\rho_0}{\sqrt{4\pi Dt}}\cdot\exp\left[-\frac{1}{4Dt}\left(z-\int_0^t v(t')\,dt'\right)^2\right]。
\end{aligned} \tag{3.5}$$

(2.4) 式に対するインパルス応答としての解は上式によって与えられるものと考える。定常解 $\rho(z)$ は，(2.4) 式の定常形に $v(t) = -mg/\gamma\ (t\to\infty)$ を与えれば容易に求められ，カノニカル分布による立場での検討と比較して直ちに Nernst–Einstein の関係式が与えられている[5~7]

$$\rho(z) = \rho_0\cdot\exp\left(-\frac{mg}{\gamma D}z\right)$$

$$D = kT/\gamma, \quad \gamma = 6\pi r\eta \qquad r：粒子半径 \tag{3.6}$$

η：周囲の粘性係数

§4　解に関する考察

(2.5) 式で与えられる $v(t)$を，集団平均<　>による部分 $v_0(t)$及びゆらぎの部分 $v_f(t)$とすると

$$v(t) = v_0(t) + v_f(t), \qquad v_0(t) = \langle v(t)\rangle, \tag{4.1}$$

ただし

$$v_0(t)= v_0\cdot\cos\theta\cdot\exp\left(-\frac{\gamma}{m}t\right)-\left(\frac{mg}{\gamma}\right)\left[1-\exp\left(-\frac{\gamma}{m}t\right)\right] ,$$

$$v_f(t)=\frac{1}{m}\int_0^t R(t')\ \exp\left[-\frac{\gamma}{m}(t-t')\right]dt' ,\quad \langle v_f(t)\rangle=0 。$$

拡散への寄与は $v_0(t)$ のみであるとして，（3.5）式の $v(t)$ に $v_0(t)$ を代入すると

$$\frac{\rho(z,t)}{\rho_0}=\frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\exp\Big\{-\frac{z^2}{4Dt}+\frac{mz}{2\gamma Dt}\Big[v_0\cos\theta\left(1-\exp\left(-\frac{\gamma}{m}t\right)\right)$$

$$-gt\left(1-\frac{m}{\gamma t}\left(1-\exp\left(-\frac{\gamma t}{m}\right)\right)\right)\Big]$$

$$-\frac{1}{4Dt}\left(\frac{m}{\gamma}\right)^2\Big[v_0\cdot\cos\theta\left(1-\exp\left(-\frac{\gamma t}{m}\right)\right)$$

$$-gt\left(1-\frac{m}{\gamma t}\left(1-\exp\left(-\frac{\gamma t}{m}\right)\right)\right)\Big]^2\Big\} 。\qquad (4.2)$$

$\gamma t/m$ を無次元化時刻の基準として，（4.2）式はそれぞれ次のように近似される。

$$\frac{\rho(z,t)}{\rho_0}\begin{cases}\approx\dfrac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\ \exp\left[-\dfrac{z^2}{4Dt}+\dfrac{v_0\cos\theta}{2D}\cdot z-\dfrac{v_0^2\cos^2\theta}{4D}\,t\right. \\ \qquad\qquad ,\ \dfrac{\gamma t}{m}\ll 1 , & (4.3)\\ \approx\dfrac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\exp\left[-\dfrac{z^2}{4Dt}-\dfrac{mg}{2\gamma D}\left(z+\dfrac{mg}{2\gamma}t\right)\right] \\ \qquad\qquad ,\ \dfrac{\gamma t}{m}\gg 1\quad t\gg\dfrac{v_0\cos\theta}{g} 。 & (4.4)\end{cases}$$

粒子の重力方向への速度を無視すれば，（3.5）式から直接に従来の Gauss 分布解[1~4] $\rho_0(z,t)$ が得られる。

$$\frac{\rho_0(z,t)}{\rho_0}=\frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\exp\left(-\frac{z^2}{4Dt}\right) ,\qquad v(t)=0$$
$$(v_0=0,\quad g=0\ ) 。\qquad (4.5)$$

（4.2）式で $v_0=0$ とすると，（4.5)式との比較によって自由落下での拡散に対する重力の影響が求められる。したがって，両式の比の計算結果を図１に示す。

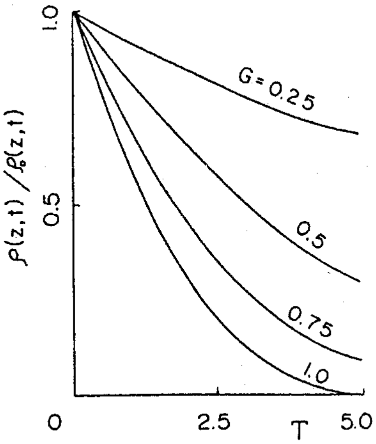

図　1.

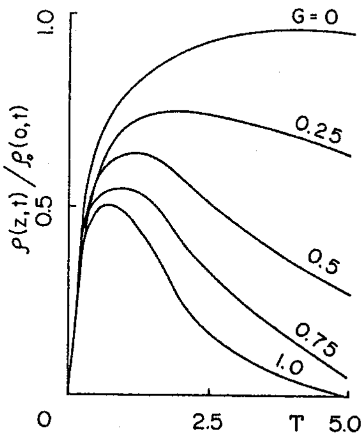

図　2.

この場合の計算の基準として，位置，重力及び時刻のそれぞれ無次元化量として

$\sqrt{\gamma/(mD)}\cdot z = 1.0$　，$G=\dfrac{g}{2}\sqrt{m^3/(\gamma^3 D)}$ 及び $T=\gamma t/m$ によって与えられる。

さらに分布の立上り特性を示すために，(4.2)式と(4.5)式での $z=0$ の値との比が図2に示される。

これらによると，図1では G の増加に伴なってGauss分布からのずれと減衰度が増すことが認められ，同様に図2では立上りが早くなりそのピークが低くなってくるのが認められる。これらのずれを評価するために，$\rho(z,t)$ の統計的平均の位置を $<z>$ で定義し，重力場を考慮した場合を $<z>_g$ 考慮しない場合を $<z>_0$ で示すと，(3.5)式から直接にまたは(4.2)及び(4.5)式から

$$<z>_g = \int_{-\infty}^{\infty} z\cdot\rho(z,t)\,dz \Big/ \int_{-\infty}^{\infty}\rho(z,t)\,dz$$

$$= \int_0^t v(t')\,dt'$$

$$= \left(\frac{m}{\gamma}\right)^2\cdot g\left[1-\frac{\gamma}{m}t-\exp\left(-\frac{\gamma}{m}t\right)\right],\quad v_0=0$$

$$v(t)\rightarrow v_0(t) \qquad (4.6)$$

$$\approx 0 \quad , \quad \frac{\gamma}{m}t \ll 1 \ , \qquad (4.7)$$

$$\approx -\frac{mg}{\gamma}t \qquad \frac{\gamma}{m}t \ll 1\ ,\ , \qquad (4.8)$$

$$< z >_0 = \int_{-\infty}^{\infty} z \cdot \rho_0(z,t)\ dz \Big/ \int_{-\infty}^{\infty} \rho_0(z,t)\,dz$$

$$= 0 \quad 。 \tag{4.9}$$

(4.6) 式は，まさに粒子の拡散における平均的位置の重力による“ずれ”を示す。さらに分散$<(\Delta z)^2>$は

$$<(\Delta z)^2>_g = <z^2>_g - (<z>_g)^2$$

$$= 2Dt$$

$$= <(\Delta z)^2>_0 \tag{4.10}$$

となり，重力場に無関係に両者が等しいことが理解される。

残された問題として

a) ステップや周期波入力に対して (2.4) 式が解析的にどう解けるか。

b) $R(t)$ を考慮した場合 (または $v_f(t)$) はどうなるか。

c) $\rho(z,t)$ の相関について，ランダムプロセスと Markoff プロセスの各々に対する場合の解析結果から，Gauss 分布 (重力無視の場合) によるものからの“ずれ”はいかに表わされるか，等が考えられる。

参考文献

1) M. C. Wang and G. E. Uhlenbeck: Rev. Mod. Phys. **17** (1945) 323.

2) P. Pasquill: *Atomospheric Diffusion* (D. Van Nostrand Co., Princeton, 1962) Chap. 5, P. 179–214.

3) J. Crank: *The Mathematics of Diffusion* (Oxford at the Clarendon press, London, 1965) Chap. , P. 9–12.

4) J. R. Manning: *Diffusion Kinetics for Atoms in Crystals* (D. Van Nostrand Co., Princeton, 1968) Chap. 1, P. 28–29, Chap. 2, P. 57–74.

5) S. Chandrasekher: Rev. Mod. Phys. **15** (1943) 1.

6) W. W. Mullins: J. Appl. Phys. **43** (1972) 665.

7) G. G. Emch: J. Math. Phys. **14** (1973) 1775.

8) H. C. Meng and H. J. Kunze: Phys. Fluids **22** (1979) 1082.

9) C. J. Tranter: *Integral Transforms in Mathematical Physics* (Chapman and Hall LTD., London 1971) Chap. , P. 32.

10) C. V. Heer: *Statistical Mechanics, Kinetic Theory and Stochastic Processes* (Academic Press, New York and London, 1972) Chap. , P. 96–112.

11) K. Etori: to be published.